



University of Groningen

## A molecular-statistical description of nematic liquid crystals

Ypma, Jan Germano Jurjen

**IMPORTANT NOTE:** You are advised to consult the publisher's version (publisher's PDF) if you wish to cite from it. Please check the document version below.

### *Document Version*

Publisher's PDF, also known as Version of record

### *Publication date:*

1977

[Link to publication in University of Groningen/UMCG research database](#)

### *Citation for published version (APA):*

Ypma, J. G. J. (1977). A molecular-statistical description of nematic liquid crystals. s.n.

### **Copyright**

Other than for strictly personal use, it is not permitted to download or to forward/distribute the text or part of it without the consent of the author(s) and/or copyright holder(s), unless the work is under an open content license (like Creative Commons).

### **Take-down policy**

If you believe that this document breaches copyright please contact us providing details, and we will remove access to the work immediately and investigate your claim.

Downloaded from the University of Groningen/UMCG research database (Pure): <http://www.rug.nl/research/portal>. For technical reasons the number of authors shown on this cover page is limited to 10 maximum.

## SAMENVATTING

Dit proefschrift handelt over de moleculaire theorie van nematische vloeibare kristallen. Het begint, in hoofdstuk I, met een algemene inleiding over vloeibare kristallen. Een aantal organische kristallen, opgebouwd uit langgerekte moleculen, vormen bij het smeltpunt eerst een anisotrope vloeibare fase, alvorens, bij een hogere temperatuur, over te gaan in een isotrope vloeistof. De anisotrope tussenfase noemt men vloeibaar-kristallijn, omdat ze zowel eigenschappen van vloeistoffen (lage viscositeit) als van kristallen (anisotropie) bezit. De anisotropie van vloeibare kristallen uit zich in optische, magnetische, dielectrische en dynamische eigenschappen. Ze wordt veroorzaakt door de neiging tot parallelle oriëntatie van de moleculaire lengte-assen. In *nematische* vloeibare kristallen, waartoe zich dit proefschrift beperkt, zijn de moleculaire oriëntaties geordend, de zwaartepunten van de moleculen zijn ruimtelijk ongeordend.

Moleculaire theorieën, die de nematisch-isotrope overgang beschrijven, kan men ruwweg indelen in

- 1) theorieën die de nematische ordening toeschrijven aan de Van der Waalskrachten tussen anisotroop polariseerbare moleculen, zoals de Maier-Saupe theorie, en
- 2) theorieën die gebaseerd zijn op de afstotende wisselwerking tussen langgerekte moleculen, zoals de Onsager theorie. De vorm van de moleculen speelt hier een essentiële rol.

In hoofdstuk II worden de vorm en herkomst van de intermoleculaire wisselwerking in het kort besproken. De theorieën van Maier en Saupe en van Onsager, die geheel verschillende uitgangspunten hebben, worden kort samengevat. Omdat deze theorieën gebruik maken van de zgn. moleculair-veld benadering, zijn ze niet in staat een aantal prekritische verschijnselen te beschrijven, die waargenomen worden in de isotrope fase, vlak boven de overgangstemperatuur. Deze verschijnselen hangen

nauw samen met het feit dat de correlatielengte, d.i. de afstand waarover moleculaire oriëntaties nog gecorreleerd zijn, in de isotrope fase eindig is.

In hoofdstuk III wordt een methode beschreven die rekening houdt met de korte afstandsorde in de moleculaire oriëntaties. De methode is een variant van de clustervariatie methoden uit de theorie van legeringen en van het ferromagnetisme. De locale orde blijkt, in het Maier-Saupe model, een sterke invloed te hebben op de sprong in de lange-afstandsordeparameter en de latente warmte bij de nematisch-isotrope fase-overgang.

In hoofdstuk IV wordt de methode uit het vorige hoofdstuk toegepast om een tweetal prekritische verschijnselen in de isotrope fase te beschrijven nl. de dubbele breking, geïnduceerd door een magnetisch veld en de lichtverstrooiing ten gevolge van fluctuaties in de moleculaire oriëntaties. De resultaten stemmen, althans kwalitatief, overeen met het experiment.

Het vloeistofkarakter van nematische vloeibare kristallen is in de hoofdstukken III en IV buiten beschouwing gelaten. De fase-overgang werd verondersteld plaats te vinden bij constant volume. Uit experimenten is gebleken dat dichtheidsveranderingen een belangrijke invloed hebben op de overgangstemperatuur, de ordeparameter e.d. In de resterende hoofdstukken is daarom getracht een toestandsvergelijking te formuleren, die de verschillende invloeden van volume, temperatuur en druk op de ordening en de nematisch-isotrope overgang redelijk kan beschrijven. Hoofdstuk V geeft een toestandsvergelijking die gebaseerd is op de veronderstellingen van de Maier-Saupe theorie in zijn meest extreme vorm. Hierbij wordt de nematische ordening uitsluitend toegeschreven aan de wisselwerking tussen anisotrope polariseerbaarheden van bolvormige moleculen. De afstotende krachten tussen harde bollen worden behandeld in de zgn. Percus-Yevick benadering. Op de anisotrope aantrekkende wisselwerking wordt de molecuulair-veld benadering toegepast. De relatieve invloed van temperatuur- en dichtheidsvariaties op de nematische ordening stemt in dit model niet goed overeen met experimentele gegevens. Een sterke verbetering op dit punt wordt verkregen door de vorm van de moleculen enigszins van een bol te laten

afwijke  
tenslot  
taties  
de als  
gen vo  
stemmer

afwijken, zoals beschreven wordt in hoofdstuk VI. In hoofdstuk VII, tenslotte, wordt de invloed van locale orde in de moleculaire oriëntaties in de berekening meegenomen. Daarbij wordt van dezelfde methode als in de hoofdstukken III en IV gebruik gemaakt. Modelberekeningen voor het bekende nematisch-vloeibare kristal para-azoxyanisol stemmen verrassend goed overeen met experimentele gegevens.

5158  
1977